

Сдвиг центра тяжести гало первой координационной сферы в область малых углов говорит о росте межатомных расстояний, соответственно, о росте свободного объема, и в целом о росте неравновесности аморфной фазы. Наиболее интенсивное изменение структурных параметров происходит после аккумуляющей ИПДК.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ- № 20-08-00497.

Список публикаций:

[1] Greer A.L. // *Mater. Today* 12, 2009, 14–22.

[2] Abrosimova G.E. *EVOLUTION OF THE STRUCTURE OF AMORPHOUS ALLOYS* // *Physics-Uspekhi*, 2011, Т. 54, № 12, С. 1227-1242.

[3] Louzguine-Luzgin D.V., Inoue A. *Bulk Metallic Glasses. Formation, Structure, Properties, and Applications* // *Handbook of Magnetic Materials*, Edited by K.H.J. Buschow, 2013, Elsevier Vol. 21, pp. 131-171

[4] Валиев Р.З., Пушин В.Г., Гундеров Д.В., Попов А.Г. // Докл. РАН, 2004, Т. 398, № 1, С. 54.

[5] Попов А.Г., Гавико В.С., Щеголева Н.Н., Шредер Л.А., Столяров В.В., Гундеров Д.В., Жан Х.Ю., Ли В., Ли Л.Л. Интенсивная пластическая деформация быстрозакаленного сплава Nd9Fe85B6 // *Физика металлов и материаловедение*, 2007, Т. 104, № 3, С. 251-260.

[6] Abrosimova G.E., Aronin A.S., Dobatkin S.V., Kaloshkin S.D., Matveev D.V., Rybchenko O.G., Tatiyanin E.V., Zverkova I.I. The formation of nanocrystalline structure in amorphous Fe-Si-B alloy by severe deformation // *Journal of Metastable nanocrystalline Materials*, 2005, v. 24-25, p.69.

[7] Gunderov D.V., Slesarenko V.Yu., Churakova A.A., Lukyanov A.V., Soshnikova E.P., Pushin V.G., Valiev R.Z. Evolution of the amorphous structure in melt-spun Ti50Ni25Cu25 alloy subjected to high pressure torsion deformation *Intermetallics*, 2015, V. 66, P. 77–81.

[8] Gunderov D.V., Slesarenko V.Yu., Lukyanov A.V., Churakova A.A., Boltynjuk E.V., Pushin V.G., Ubyivovk E.V., Shelyakov A.V. and Valiev R.Z. Stability of an Amorphous TiCuNi Alloy Subjected to High-Pressure Torsion at Different temperatures // *Advanced Engineering Materials*, 2015, V. 17, Is. 12, p. 1728–1732.

[9] Гундеров Д.В. Амorfизация и нанокристаллизация при ИПД кристаллических и аморфных сплавов // *Нефтегазовые технологии и новые материалы. Проблемы и решения. Сборник научных трудов* Выпуск 2(7), 2013, стр 395-411.

[10] Гундеров Д.В., Болтынюк Е.В., Убийвовк Е.В., Чуракова А.А., Лукьянов А.В., Прокофьев Е.А., Кишманев А.М., Рерих С.И., Мулюков В.Ф., Хасанова Д.А. Структура и микротвердость аморфного сплава на основе Zr подвергнутого ИПД и отжигу // *Сборник научных трудов «Нефтегазовые технологии и новые материалы. Проблемы и решения: Вып. 5 (10). — Уфа: ООО «Монография», 2016, С. 382-389.*

[11] Gunderov D.V., Churakova A.A., Astanin V.V., Asfandiyarov R.N., Hahn H., Valiev R.Z. Accumulative HPT of Zr-based bulk metallic glasses // *Journal*, 2020, *Materials Letters* 261

Исследование влияния мартенситных превращений на свойства сплавов с эффектом памяти формы

Чуракова Анна Александровна

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН

Уфимский государственный авиационный технический университет

churakovaa_a@mail.ru

Сплавы на основе никелида титана (TiNi) принадлежат к классу функциональных материалов с эффектами памяти формы (ЭПФ), обусловленными термоупругими мартенситными превращениями «B2-B19'», протекающими в диапазоне температур, близких к комнатным [1-4]. Данные сплавы широко используются в медицине и технике. В качестве материалов исследования были выбраны: эквиатомный сплав Ti50Ni50 и сплав Ti49,15Ni50,85 с большим атомным содержанием Ni относительно стехиометрии. Сплав Ti50Ni50 имеет температуры МП около 80°C и при комнатной температуре находится в мартенситном состоянии. Сплав Ti49,15Ni50,85 после закалки находится при комнатной температуре в аустенитном состоянии, а при нагревах до 500°C в нем происходят процессы старения и повышение температур МП. Для формирования УМЗ структуры закаленные образцы сплавов TiNi цилиндрической формы были подвергнуты 8 циклам РКУП на оснастке с углом пересечения каналов 120° при температурах 400°C, 450°C. Для получения НК структуры образцы были подвергнуты ИПДК в бойках с «канавкой» глубиной 0,6 мм и диаметром 20 мм при давлении Р=6 ГПа и последующему отжигу при температуре 350°C. Термоциклирование на образцах в различных исходных состояниях осуществлялось путем последовательного погружения образцов в жидкий азот (-196°C) с последующим нагревом до температуры 150°C на электрической плитке, что, соответственно, заведомо ниже и выше температур прямого и обратного мартенситного превращений. Термоциклированию подвергались образцы сечением менее 1 мм, что обеспечивало быстрые нагрев и охлаждение образцов. Число термоциклов «нагрев – охлаждение» варьировалось от 0 до 100. Время выдержки при температуре нагрева и охлаждения составляло 5 мин.

Анализ микроструктуры сплавов в исходном крупнозернистом (КЗ) состоянии проводили на оптическом микроскопе OLYMPUS GX51. Исследования тонкой структуры проводили методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на микроскопе JEOL-2100. Рентгеноструктурные исследования проводили на дифрактометрах Rigaku Ultima IV и Siemens D5000 в Cu-Kα излучении с длиной волны $\lambda=1,54418 \text{ \AA}$, съемку проводили при комнатной и повышенной температурах (100°-150°C для анализа сплавов в заведомо аустенитном состоянии). Микротвердость Hv определяли по методу Виккерса, согласно ГОСТ 9450 - 76, на приборе Buehler «Micromet-5101» при нагрузке 1 Н и длительностью выдержки под нагрузкой 10 секунд.

Калориметрические исследования осуществлялись на дифференциальном сканирующем калориметре Netzsch DSC 204 F1 Phoenix на образцах массой 50 мг (диаметром 3,5 мм, толщиной 0,5-0,7 мм) при

охлаждении и нагреве в интервале температур от -150° до 150°C со скоростью $20^{\circ}\text{C}/\text{мин}$. Температуры превращений определяли методом касательных (стандарт ASTM 2004 - 05), энергию превращений определяли по площади под калориметрическим пиком ДСК.

Механические испытания на растяжение малых плоских образцов с рабочей частью $1*0,25*4$ мм проводились при комнатной температуре со скоростью деформации $1*10^{-3}$ с-1 на специальной установке конструкции ИФПМ УГАТУ и установке Shimadzu AG-50kNXD в лаборатории механики перспективных массивных наноматериалов СПбГУ. Оценочное реактивное напряжение (σ_r) определялось по известной формуле $\sigma_r = \sigma_t - \sigma_m$, где σ_t – предел текучести, σ_m – предел фазовой текучести, а обратимая деформация ($\epsilon_{\text{ПУ}}$) оценивалась по длине площадки фазовой текучести.

Показано, что, как и в крупнозернистых (КЗ) сплавах, в ультрамелкозернистых (УМЗ) и нанокристаллических (НК) сплавах TiNi происходят последовательные изменения структуры и свойств, вызванные фазовым наклепом, при увеличении количества термоциклов вплоть до $n=100$ с быстрым нагревом и быстрым охлаждением до -196°C . Показано, что при термоциклировании КЗ и УМЗ сплавов Ti50Ni50 по выбранным режимам направление изменения температур мартенситных превращений меняется в процессе термоциклирования - с нарастанием числа термоциклов сначала наблюдается снижение температур а затем их рост. Температуры превращений в ультрамелкозернистом состоянии в сплаве Ti49,15Ni50,85 в целом более стабильны к термоциклированию, чем в КЗ. Также продемонстрировано, что упрочнение, вызванное фазовым наклепом, в УМЗ состояниях исследованных сплавов TiNi происходит несколько более интенсивно, чем в КЗ.

Список публикаций:

- [7] В.Н. Хачин, *Никелид титана: структура и свойства*, Москва, Наука, Россия 1992, 161 с.
- [8] V. Brailovski, S. Prokoshkin, P. Terriault, F. Trochu, *Shape memory alloys: fundamentals, modeling, applications*, Montreal, Ecole de technologie supérieure (ETS) Publ. Canada 2003, 851 p.
- [9] K. Otsuka, *Shape Memory Materials* (Eds: K. Otsuka, C.M. Wayman), Cambridge, Cambridge University Press, UK 1999, 284 p.
- [10] В.Э. Гюнтер, *Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы* (Eds: В.Э. Гюнтер, Г.Ц. Дамбаев, П.Г. Сысолятин), Томск, ТГУ, Россия 1998, 487 с.

Поиск новых стабильных монокристаллических аллотропных форм углерода методом USPEX

Шаязdanов Айгиз Рашитович

Бакирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Набиуллин Ильсур Рашитович к.ф.-м.н.

aigizshayazdanov33@gmail.com

Углерод – уникальный химический элемент, существующий в различных аллотропных модификациях, проявляющих разные химические и физические свойства благодаря способности образовывать структуры с различным типом гибридизации химических связей (sp -, sp^2 -, и sp^3). На сегодняшний момент кристаллические формы углерода включают в себя графит, алмаз, гексагональный алмаз (лонсдейлит), нанотрубки, фуллерены и даже атомные цепочки (карбины) с кардинально отличающимися друг от друга свойствами.

Среди монокристаллических материалов самым твёрдым материалом является кубическая фаза алмаза, в то время как графит является наименее твёрдым материалом в силу своей слоистой природы. Изучение механизма превращения одной формы углерода в другую, поиск углеродных структур с уникальными электронными, механическими и упругими свойствами, являются предметом исследования экспериментальных и теоретических работ. Особый интерес уделяется поиску новых сверхтвёрдых материалов с высокими значениями твердости и объёмного модуля, сопоставимыми с алмазом. Известно, что графит переходит в кубический или гексагональный алмаз при высоком давлении (> 15 ГПа) и температуре (> 1300 К). Сжатый графит выступает в качестве исходного материала при переходе в различные сверхтвёрдые фазы.

Целью данной научной работы является получение алмазоподобных структур близких по свойству к алмазу. За счет своих уникальных механических свойств, сверхтвёрдые материалы всегда играли важную роль в различных отраслях.

Компьютерный дизайн материалов – это новая, революционная область в науке. Вместо того, что бы полагаться на экспериментальные методы проб и ошибок или же на случай – а большинство материалов до настоящего момента были найдены именно этими способами – теперь можно открывать новые материалы на компьютере, задавая направление для экспериментальных работ.

Кристаллическая структура вещества является наиболее важным носителем информации о материале – зная структуру, можно предсказать широкий набор его свойств. Эволюционный алгоритм USPEX является одним из самых эффективных методов для предсказания различных структур.